

MÉTODO NUMÉRICO APLICADO A LOS MODELOS ANALÓGICOS CUANTIFICABLES (PARA POLÍMEROS)

A.M. Islas*, G. Guillén**, M. Olvera*** y L.E. Mercado****

0.1. Resumen

La dinámica molecular de los polímeros puede explicarse utilizando sistemas contruidos a partir de muelles y émbolos. Uno de los modelos más sustentables es el modelo de Vangheluwe¹⁾ y sus constantes paramétricas se determinan por los métodos método gráfico¹⁾, método iterativo Marquardt³⁾, método del hiperplano⁴⁾. Así mismo otro modelo importante es el modelo de Zurek²⁾ que determina sus constantes paramétricas usando un método gráfico²⁾ e iterativo Marquardt³⁾. En este trabajo se aplica la técnica de mínimos cuadrados⁵⁾ para evaluar las constantes numéricas de ambos modelos. La técnica de mínimos cuadrados⁵⁾ conduce a un sistema de ecuaciones no lineales que se resolvió por el método de Newton-Raphson⁵⁾. El resultado en ambos modelos fue sensiblemente mejor a los métodos disponibles.

Palabras clave: modelo analógico, polímeros, Vangheluwe, Zurek.

0.2. Summary: NUMERICAL METHOD APPLIED TO QUANTIFIABLE ANALOG MODELS

The molecular dynamics of polymers can be explained by means of systems constructed on the basis of springs and pistons. One of the most valid models is the Vangheluwe¹⁾ model and its parametric constants are determined by the graphic method¹⁾, the Marquardt iterative method³⁾, and the hyperplane method⁴⁾. Another important model is the Zurek model²⁾, whose parametric constants are determined using a graphic method²⁾ and the iterative Marquardt method³⁾. In this paper, we apply the least squares technique⁵⁾ to evaluate the numerical constants of both models. The least squares technique⁵⁾ leads to a system of non-linear

equations that were solved using the Newton-Raphson method⁵⁾. The results of both models were noticeably better than the available methods.

Key words: analogic model, polymer, Vangheluwe, Zurek.

0.3. Résumé: MÉTHODE NUMÉRIQUE APPLIQUÉE AUX MODÈLES ANALOGIQUES QUANTIFIABLES

La dynamique moléculaire des polymères peut s'expliquer en utilisant des systèmes construits avec des ressorts et des pistons. L'un des modèles les plus abordables est celui de Vangheluwe¹⁾ et ses constantes paramétriques sont déterminées par les méthodes suivantes: méthode graphique¹⁾, méthode itérative Marquardt³⁾, méthode de l'hyperplan⁴⁾. De même, un autre modèle important est celui de Zurek²⁾ qui détermine ses constantes paramétriques en utilisant une méthode graphique²⁾ et itérative Marquardt³⁾. Dans cette étude, la méthode des minimums carrés⁵⁾ a été appliquée pour évaluer les constantes numériques des deux modèles. La technique des minimums carrés⁵⁾ conduit à un système d'équations non linéaires qui est résolu par la méthode de Newton-Raphson⁵⁾. Dans les deux cas, le résultat a été sensiblement meilleur que celui des méthodes disponibles.

Mots clés: modèles analogiques, polymères, Vangheluwe, Zurek.

1. ANTECEDENTES

Las fibras textiles a lo largo de la cadena productiva modifican su estructura interna y por ende definen sus propiedades mecánicas y tintóreas. Para estudiar la estructura, es preciso hacer uso de medios indirectos de observación, como la difracción de los electrones, o de los rayos X, la espectrografía Raman, la resonancia magnética nuclear, etc., Así mismo métodos químicos como la sorción de yodo, la solubilidad diferencial, etc. Otra alternativa para el estudio de la estructura de las fibras textiles lo constituye la simulación del comportamiento viscoelástico cuando éstas se someten a tensión.

Los fundamentos matemáticos de la viscoelasticidad fueron establecidos por James C. Maxwell proponiendo el modelo que lleva su

* Dra. Ana María Islas. Instituto Politécnico Nacional SEPI ESIT, SIBE-IPN, EDI-IPN

** Dr. Gabriel Guillén. Instituto Politécnico Nacional SEPI ESIT, SIBE-IPN, EDI-IPN

*** Manuel Olvera. Instituto Politécnico Nacional. SEPI ESIT

**** Laura E. Mercado. Instituto Politécnico Nacional. SEPI ESIT

nombre. Considera de dos elementos ideales, el primero explica la recuperación elástica de los cuerpos sometidos a tracción y está representado por un muelle; mientras que la segunda, la variación de las dimensiones que se producen en el material a lo largo del tiempo, ya sea durante la aplicación del esfuerzo o bien después de cesar el mismo, está relacionado con las tensiones internas acumuladas en el material que se liberan gradualmente y se representa por un émbolo.

Uno de los modelos más sustentables y recientes es el modelo de Vangheluwe¹⁾ que está constituido por un elemento de Maxwell colocado en paralelo con un muelle no lineal de módulo C. En la figura 1 se representa el modelo de Vangheluwe que relaciona la carga σ y el alargamiento γ por la ecuación (1):

$$\sigma = A(1 - e^{-B\gamma}) + C\gamma^2 \quad (1)$$

donde,

A es la tenacidad en la fluencia, $A = \eta r$, siendo r la razón de deformación.

B es el cociente de la inversa del tiempo de relajación del elemento de Maxwell y la razón de deformación, y

C es el módulo del muelle no lineal

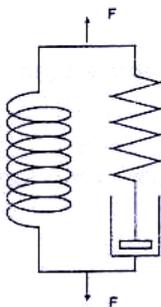


FIGURA 1: El modelo de Vangheluwe

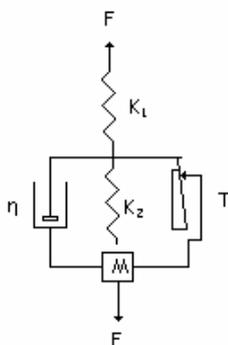


FIGURA 2: El modelo de Zurek

Los métodos utilizados para evaluar los parámetros numéricos del modelo de Vangheluwe¹⁾ son:

- Método gráfico¹⁾
- Método iterativo Marquardt³⁾
- Método del hiperplano⁴⁾

El primer método es el propuesto por Vangheluwe en 1992, así como la optimización de los mismos a través del método iterativo Marquardt, el método del hiperplano es una modificación del algoritmo de Guggenheim y queda definido por la expresión siguiente:

$$\sigma' = \sigma e^{-B\tau} + \gamma^2 C(1 - e^{-B\tau}) + \gamma 2C\tau + [A(1 - e^{-B\tau}) + C\tau^2] \quad (2)$$

Aunque sería posible tratar a la ecuación anterior como una función lineal en tres dimensiones, resulta cómodo hacerlo con un hiperplano de cuatro dimensiones, considerando a γ^2 como una variable independiente, de donde se puede determinar de manera inmediata a los parámetros A, B y C.

Otro modelo importante es el modelo de Zurek²⁾, en el cual el mecanismo de resistencia es remplazado por un sistema de fricción interna de masa M y fuerza de fricción T proporcional al alargamiento. La fricción interna está incorporado a un sistema en paralelo compuesto por un muelle de Hooke con una constante k_2 y un émbolo de Newton de viscosidad η . Todo conectado a un extremo de un muelle de Hooke de constante k_1 . En la figura 1 se representa el modelo de Zurek y cumple la siguiente ecuación:

$$\sigma = A\gamma + B + (C\gamma - B)e^{-D\gamma} \quad (3)$$

donde,

A es la rigidez,

B está determinado como la pendiente de la recta $\sigma_\infty = A\gamma + B$ contra el eje

Las constantes numéricas del modelo de Zurek²⁾ se determinan por los siguientes métodos:

- Método gráfico²⁾
- Método iterativo Marquardt³⁾

5.1 Técnica de mínimos cuadrados

En este apartado se aplica la técnica de mínimos cuadrados⁵⁾ al modelo de Vangheluwe para ajustar los datos extraídos de la curva tenacidad-alargamiento de hilos textiles. Luego entonces:

$$S = \sum_{i=1}^n [(A(1 - e^{-B\gamma}) + C\gamma^2 - \sigma)]^2$$

Resolviendo las ecuaciones normales

$$\frac{\partial S}{\partial A} = \frac{\partial S}{\partial B} = \frac{\partial S}{\partial C} = 0,$$

Tenemos un sistema de tres ecuaciones no lineales con tres incógnitas indicada en⁴⁾:

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial A} &= \sum_{i=1}^n [(A(1 - e^{-B\gamma_i}) + C\gamma_i^2 - \sigma)](1 - e^{-B\gamma_i}) = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial B} &= \sum_{i=1}^n [A(1 - e^{-B\gamma_i}) + C\gamma_i^2 - \sigma](\gamma_i e^{-B\gamma_i}) = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial C} &= \sum_{i=1}^n [A(1 - e^{-B\gamma_i}) + C\gamma_i^2 - \sigma](\gamma_i^2) = 0 \end{aligned} \quad (4)$$

Es imposible simplificar más a este sistema no lineal. Sin embargo es posible resolverlo por un método iterativo, que en el caso de este trabajo es el método de Newton-Raphson⁵⁾, que consiste en: Plantear el sistema de tres ecuaciones no lineales con tres incógnitas f_1, f_2 y f_3 (4) y calcular el Jacobiano (matriz formada por las derivadas parciales de las funciones del sistema que se aplica con la finalidad de linealizar a este).

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial A} & \frac{\partial f_1}{\partial B} & \frac{\partial f_1}{\partial C} \\ \frac{\partial f_2}{\partial A} & \frac{\partial f_2}{\partial B} & \frac{\partial f_2}{\partial C} \\ \frac{\partial f_3}{\partial A} & \frac{\partial f_3}{\partial B} & \frac{\partial f_3}{\partial C} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -f_1 \\ -f_2 \\ -f_3 \end{bmatrix}$$

Se calculó sustituyendo los valores de A, B y C con un vector solución $[A_0, B_0, C_0]$, que inicialmente valdrá $[0, 0, 0]$ esto por la necesidad de contar con un estimador inicial⁵⁾. Se obtiene un sistema de tres ecuaciones lineales con tres incógnitas que se resolvió por Gauss-Jordan, entonces tenemos un vector solución $[h, k, l]$ que sumado al vector solución $[A_0, B_0, C_0]$ conduce a los valores para $[A_1 = A_0 + h, B_1 = B_0 + k, C_1 = C_0 + l]$. Se procedió a calcular la siguiente iteración con los nuevos valores de $[A_1, B_1, C_1]$ hasta que el vector solución fue convergente al sistema de ecuaciones no lineales, el proceso iterativo se detuvo al llegar a la distancia mínima (criterio de paro para el proceso iterativo) que se planteó al inicio del proceso. En ocasiones los sistemas no lineales son inconsistentes y si se toma el vector $[0, 0, 0]$ como vector inicial para el proceso iterativo, puede que no converja a la solución, sólo entonces, se auxilia con una línea de tendencia exponencial y los

valores obtenidos son estimadores iniciales para el proceso iterativo.

Ahora, aplicando la misma técnica de mínimos cuadrados al modelo de Zurek²⁾, tenemos:

$$S = \sum_{i=1}^n [(A\gamma_i + B + (C\gamma_i - B)e^{-D\gamma_i} - \sigma)]^2$$

Resolviendo las ecuaciones normales $\frac{\partial S}{\partial A} = \frac{\partial S}{\partial B} = \frac{\partial S}{\partial C} = \frac{\partial S}{\partial D} = 0$, obtenemos un sistema de cuatro ecuaciones no lineales con cuatro incógnitas⁵⁾:

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial A} &= \sum_{i=1}^n [(A\gamma_i + B + (C\gamma_i - B)e^{-D\gamma_i} - \sigma)](\gamma_i) = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial B} &= \sum_{i=1}^n [(A\gamma_i + B + (C\gamma_i - B)e^{-D\gamma_i} - \sigma)](1 - e^{-D\gamma_i}) = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial C} &= \sum_{i=1}^n [(A\gamma_i + B + (C\gamma_i - B)e^{-D\gamma_i} - \sigma)](\gamma_i e^{-D\gamma_i}) = 0 \\ \frac{\partial S}{\partial D} &= \sum_{i=1}^n [(A\gamma_i + B + (C\gamma_i - B)e^{-D\gamma_i} - \sigma)][\gamma_i e^{-D\gamma_i}(B - C\gamma_i)] = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

Al igual que el sistema no lineal anterior (sólo que ahora de cuatro ecuaciones con cuatro incógnitas) es imposible simplificar más. Se resolverá por el método de Newton-Raphson⁵⁾ ya descrito en el modelo anterior.

2. PARTE EXPERIMENTAL

Para el desarrollo de este trabajo se utilizaron dos hilos textiles de uso normal obtenidos por el proceso industrial convencional (algodón). Ambos hilos se sometieron al ensayo de tracción en un dinamómetro universal bajo la normativa correspondiente⁶⁾, en la figura 3 se muestra la curva tenacidad-alargamiento a partir del cual se realizó el estudio viscoelástico utilizando el modelo de Vangheluwe, la tabla 1 contiene los datos leídos de ella.

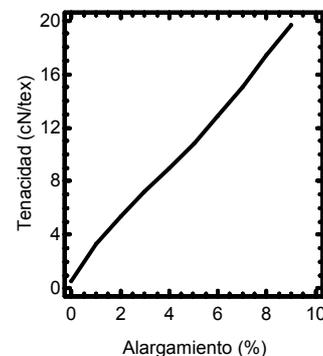


FIGURA 3: El modelo de Vangheluwe

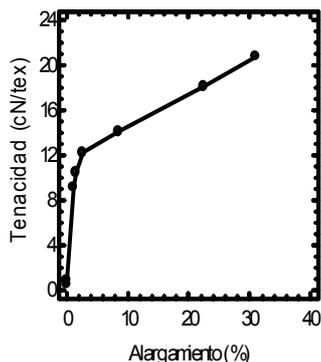


FIGURA 4: El modelo de Vangheluwe

TABLA 1

Curva tenacidad-alargamiento de hilo poliéster-
 algodón

Alargamiento γ (%)	Tenacidad σ (cN/tex)
0	0.556
1	3.336
2	5.400
3	7.224
4	9.000
5	10.800
6	12.912
7	15.000
8	17.400
9	19.704

TABLA 2

Curva tenacidad-alargamiento de hilo poliéster

Alargamiento γ (%)	Tenacidad σ (cN/tex)
0.01	0.500
0.10	0.9014
1.20	9.190
1.67	10.510
2.80	12.260
8.60	14.070
22.5	18.100
30.96	20.690

En la siguiente tabla 3, se presentan los resultados obtenidos para los parámetros del modelo de Vangheluwe a la novena iteración.

TABLA 3

Las iteraciones obtenidas por el método de Newton-Raphson (Vangheluwe)

No.	A	B	C	Distancia
0	1.84	0.307	0.3	
1	10.2305669	0.33576697	0.12263817	8.39249055
2	9.90452331	0.31824026	0.12702151	0.32654375
3	4.3626577	0.59522461	0.17955768	5.54903188
4	7.13216553	0.58824674	0.15940837	2.76958992
5	7.69824205	0.47943563	0.15132252	0.57649619
6	7.84767909	0.47905085	0.14972023	0.14944613
7	7.85114911	0.47862922	0.14967586	0.00349582
8	7.85115439	0.47862899	0.1496758	5.2874E-06
9	7.85115439	0.47862899	0.1496758	0
10	7.85115439	0.47862899	0.1496758	0

De ahí, que el modelo ajustado sea el siguiente:

$$\sigma = 7.85115439(1 - e^{-0.47862899\gamma}) + 0.1496758\gamma^2 \quad (6)$$

Los valores numéricos del modelo de Vangheluwe calculados por el método gráfico¹⁾, método iterativo Marquardt³⁾, método del hiperplano⁴⁾ y técnica de mínimos cuadrados⁵⁾, se muestran en la tabla de abajo.

TABLA 4

Valores numéricos del modelo de Vangheluwe obtenidos por técnicas distintas

Parámetros del modelo de Vangheluwe			
Técnica utilizada:	A	B	C
Método gráfico	4.0000	0.761904	0.207612
Método iterativo Marquardt	7.84479	0.479028	0.149716
Hiperplano	5.70830	0.648582	0.213690
Mínimos cuadrados	7.85110	0.478629	0.149670

A partir de las constantes numéricas obtenidas por el método Marquardt, hiperplano y mínimos cuadrados, se calculó la suma de cuadrados de los residuos llegando a 0.4441, 16.957 y 0.4440 respectivamente

En la siguiente tabla 5, se presentan los resultados obtenidos para los parámetros del modelo de Zurek a la octava iteración.

TABLA 5
 Las iteraciones obtenidas por el método de Newton-Raphson (Zurek)

No.	A	B	C	D	Distancia
0	0.1	10	4	0.5	
1	0.305869	11.194194	4.852997	0.514796	1.211899
2	0.303408	11.293771	4.738154	0.601392	0.131986
3	0.302170	11.328867	4.520062	0.663582	0.071421
4	0.299596	11.396260	4.280752	0.701434	0.077338
5	0.298687	11.419865	4.173439	0.715591	0.027540
6	0.298503	11.424645	4.152608	0.718214	0.005456
7	0.298498	11.424784	4.151968	0.718293	0.000160
8	0.298498	11.424784	4.151967	0.718294	0.000000
9	0.298498	11.424784	4.151967	0.718294	0.000000

Entonces el modelo ajustado es el siguiente:

$$\sigma = 0.298498\gamma + 11.4247 + (4.1519\gamma - 11.4247)e^{-0.7183\gamma} \quad (7)$$

3. CONCLUSIONES

El presente estudio permite formular las siguientes conclusiones:

3.1. La evaluación numérica de los parámetros del modelo de Vangheluwe es resuelto por el método gráfico, método iterativo Marquardt, método del hiperplano y la técnica de mínimos cuadrados, estos tres últimos con excelentes resultados.

3.2. En la técnica de mínimos cuadrados conduce a estimadores de los parámetros del modelo de Vangheluwe sensiblemente mejores que los alcanzados por el método del hiperplano, esto de acuerdo a la suma de cuadrados de residuo realizado.

3.3. El método iterativo de Newton-Raphson conduce con un mínimo de iteraciones a la solución óptima del modelo analógico.

4. BIBLIOGRAFÍA

1. Vangheluwe, L., "Study of the Time Dependent Mechanical Properties of Yarns for Weaving", Doctoral Thesis, University of Ghent, Belgium (1992).
2. Aksan Stanislaw & Zurek Wiltod, "A Rheological Model of Viscose Rayon", Journal of Applied Polymer Science, **19**, 3127-3129 (1975).
3. Marquardt, D. W., "An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters", Journal for the Society of Industrial and Applied Mathematics, 11:431-41 (1963).
4. Guillén, G., Islas, A. M., Ciurlizza, A., "Estudio de los parámetros del modelo de Vangheluwe para la simulación viscoelástica de estructuras textiles", XI Latin-Ibero-American Conference on Operation Research and Systems, Concepción, Chile, Memorias del congreso (2002).
5. Maron, M. & López, R. J.; "Análisis numérico. Un enfoque práctico", Ed. CECSA, México, pág. 210-217 (1999).
6. ASTM D 2256, "Tensile Properties of Yarns by the Single-Strand Method".